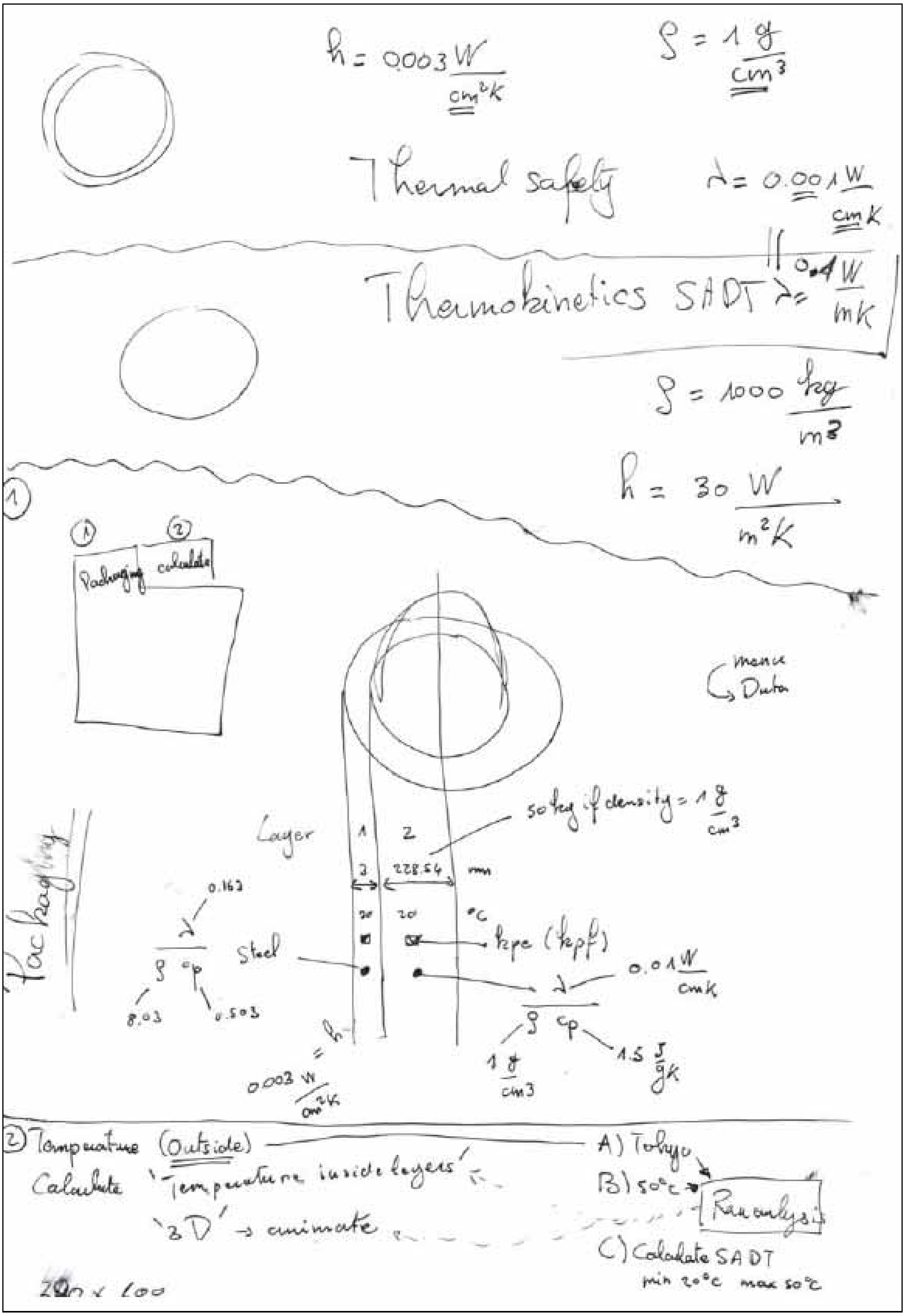
AKTS/Thermal-Safety　Version　2.36
Quick Instruction Manual

取扱説明書・ダイジェスト版

株式会社パルメトリクス

作成・訂正　2011/04/15

AKTS の Roduit さんから 2010/11/12 に説明を受けた内容から簡易取扱説明書を作成しました。



Thermal-Safety（Version2.36）の３Ｄシミュレーションの操作方法について

この簡易マニュアルでは

１：円筒形コンテナ　スチール製　厚み３mm　直径　457mm（50L 円筒形容器を想定）

２：充填（収納）する物質

解析用測定ファイルは AKTS-WEBMINAR-E-LEARNIG.kpg を使っています。

正式ライセンスソフトウエアでは測定された kpf ファイルを選択することが可能です。

例として 1 日トレーニングクラス（2010 東京）で使用した DTBP の kpf ファイルでの解析結果を示します。

３：コンテナの置かれる温度条件（初期条件）：室温 20℃　および　測定物質 20℃

この初期温度条件も自由に変更することができます・

４：環境温度設定として

Japan 東京の 8 月の気候条件

外部温度を 50℃にした場合

SADT を 20~50℃で探索計算した例

の順序で説明します。

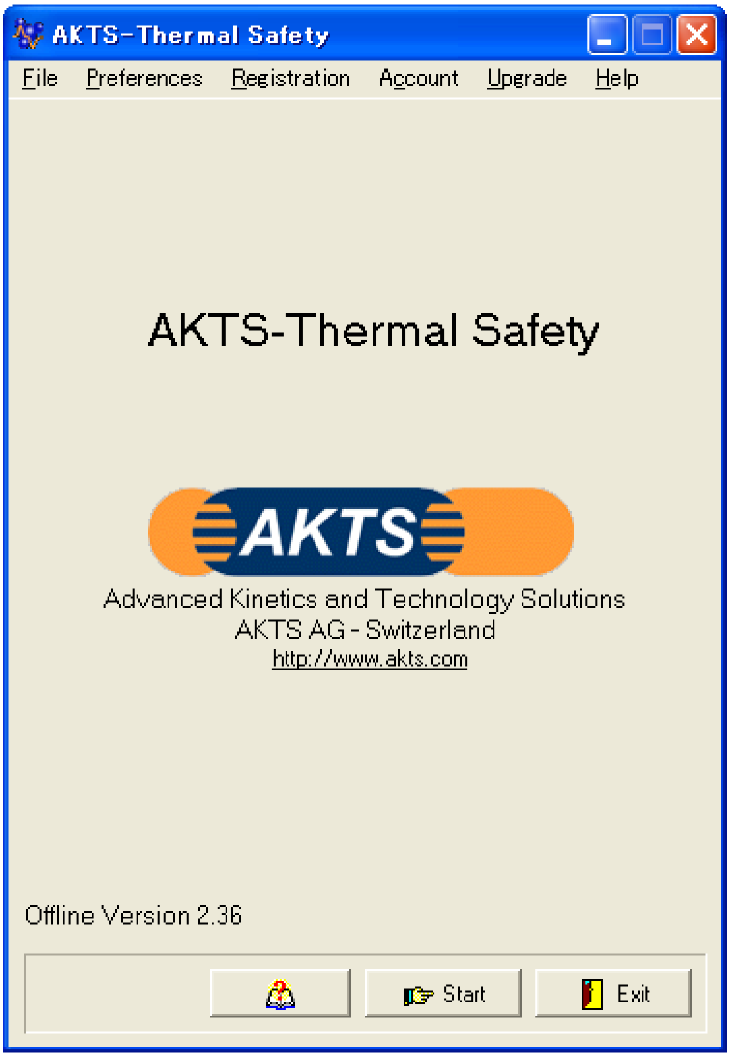
注意点：

１）Thermokinetics は熱伝導率が W/mK 単位を使用しています。

一方、Thermal Safety は W/cm^2K　単位を使用しています。

将来的には Thermal　Safety プログラムはアップグレードされ、Thermokinetics と同じ W/mK に変更されます。

２）SADT は Thermokinetics (Thermal-Safety 込み Version)では別途簡単に解析計算が可能です。新しい Version はこちらの機能を充実させる方向で Thermal Safety プログラムがアップグレードされます。



Start　をクリックする。

open saved project を選択し、**my project.AKS** ファイルをクリックする。

すでに解析された My project.aks ファイルを例にして説明します。

拡張子 aks は Thermal Safety で解析されたファイルを意味します。

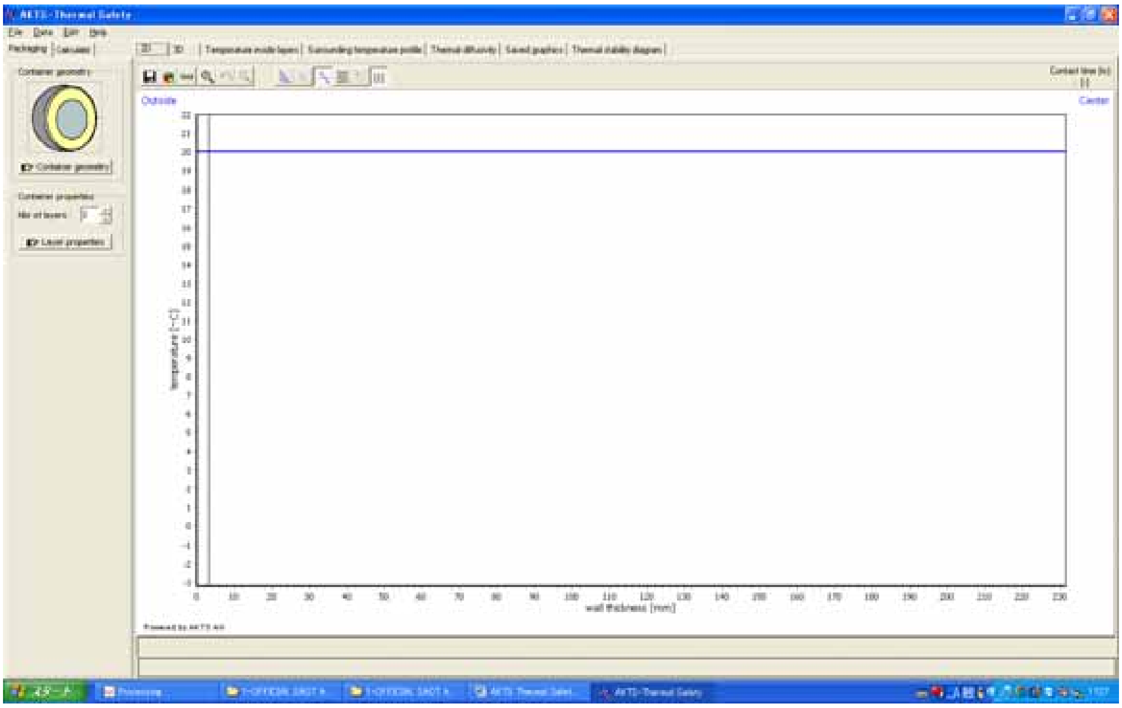


Fig-01

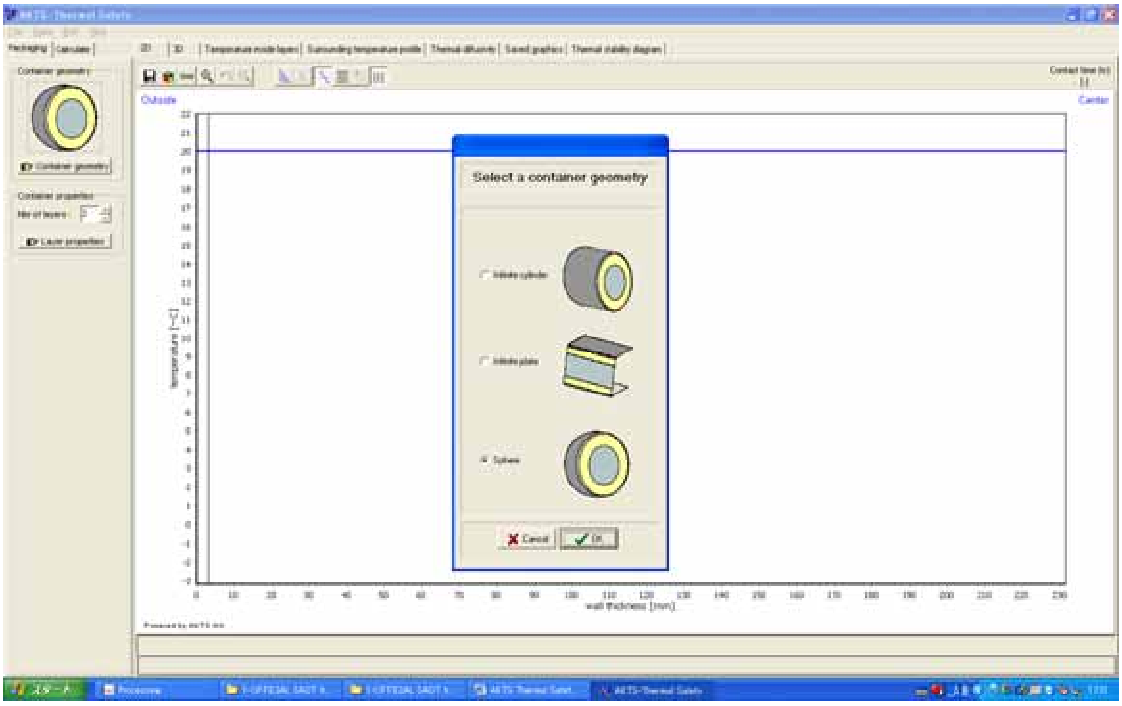


Fig-02

最初に Packaging の設定を行います。

シミュレーションするコンテナ形状種類を選択します。

(デフォルトは球 sphere が選択されています)

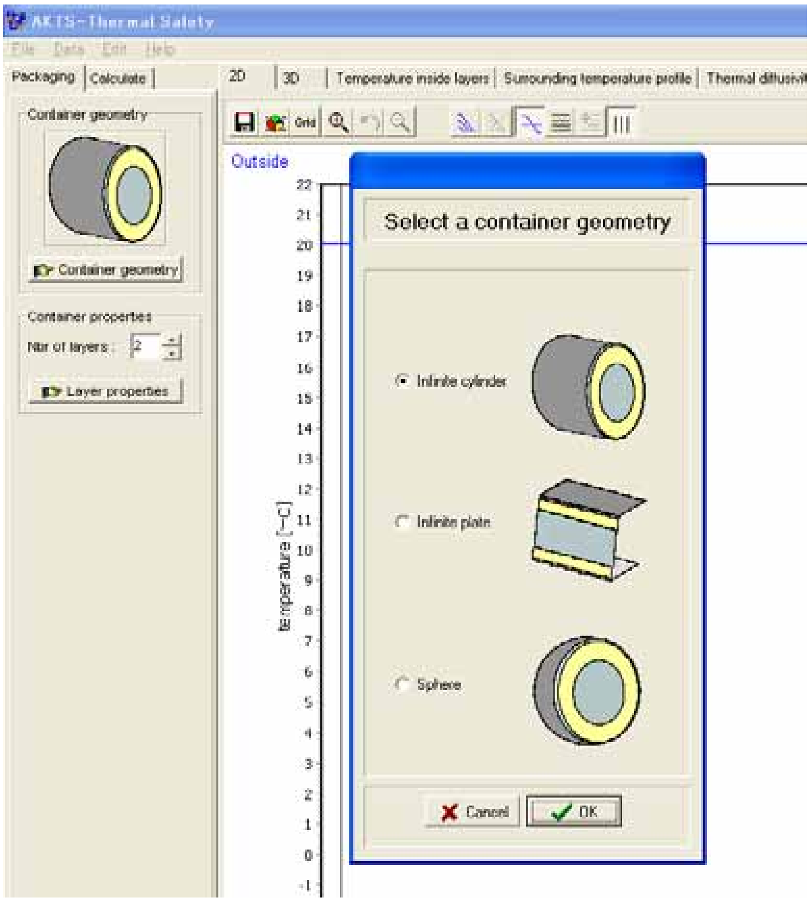


Fig-03

このマニュアル例では　container geometry　で “ 円筒 ” を選択します。

Viewer（デモ）バージョンを使った場合、geometry は Sphere に限定されています。

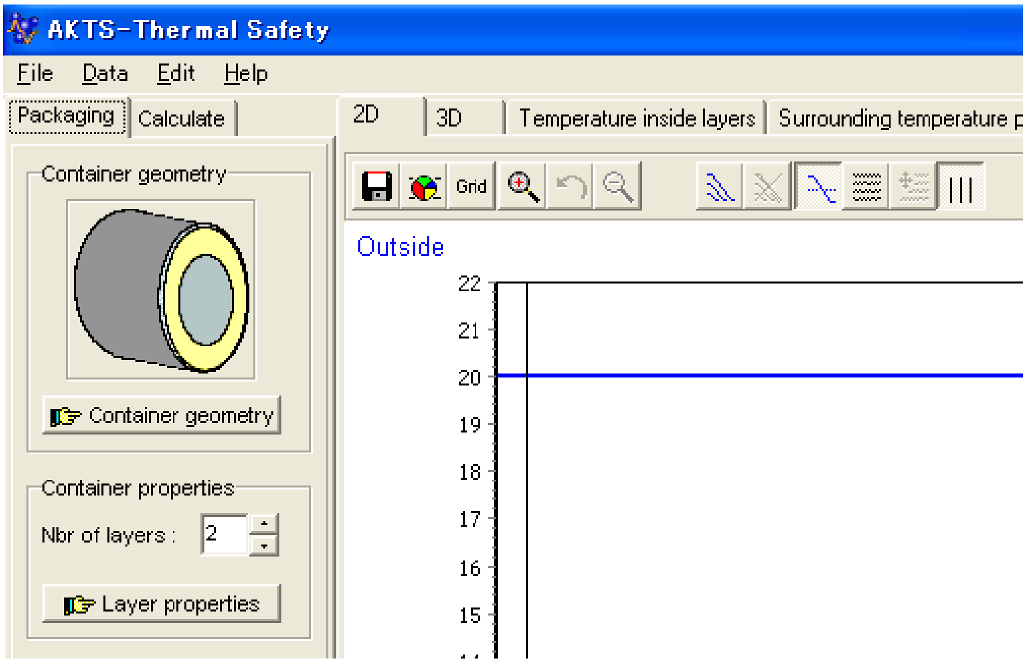


Fig-04

次に Layer　Properties を設定します。　デフォルトではレイヤーの数は 2 となっています。スチール容器（厚さ３mmが外側のレイヤー、内側レイヤーは（収容される化学物質）となります。50L のスチール円筒形コンテナに化学物質が充填されていることを想定しています。
コンテナの直径は 457mmとなっています。無限円筒形を想定しており上面・下面からの熱移動がないもの（断熱状態である）としています。

Layer　Properties をクリックすると次ページの画面が現れます。

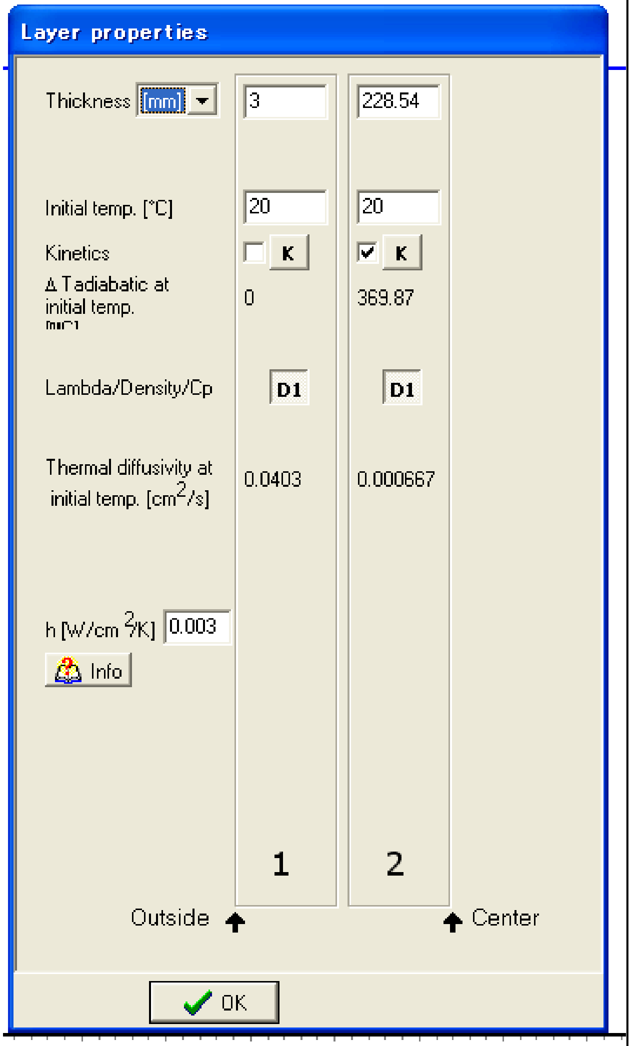


Fig-05

D1 は外側（Out-Side）
D２は中心部（Center）を意味する。
D1 欄側にコンテナの条件を入力する。
3：コンテナ厚みが 3mm であることを示す

円筒コンテナ収納部外径は r ＝228.54mm
Kは Kinetics を意味する。
D２側のK欄がクリックされており、D２の物質の Thermokinetics で得られた活性化エネルギーの解析ファイル　kpf ファイルが選択されている。

D2（収納する化学物質）を Check する。

Lamda/Density/Cp で
　熱伝導率、密度、比熱の値を設定する。
D1 をクリックすると Fig-06 の入力画面が表示される。この３個の特性数値から
初期条件におけるａ：Thermal-diffusivity
熱拡散率（単位（cm^2/s））が算出される。

h（熱伝導率　Thermal conductivity）
コンテナと外側空気層境界における熱伝導率は 0.003W/(cmK)とする。

次ページにその詳細な設定について図示します。

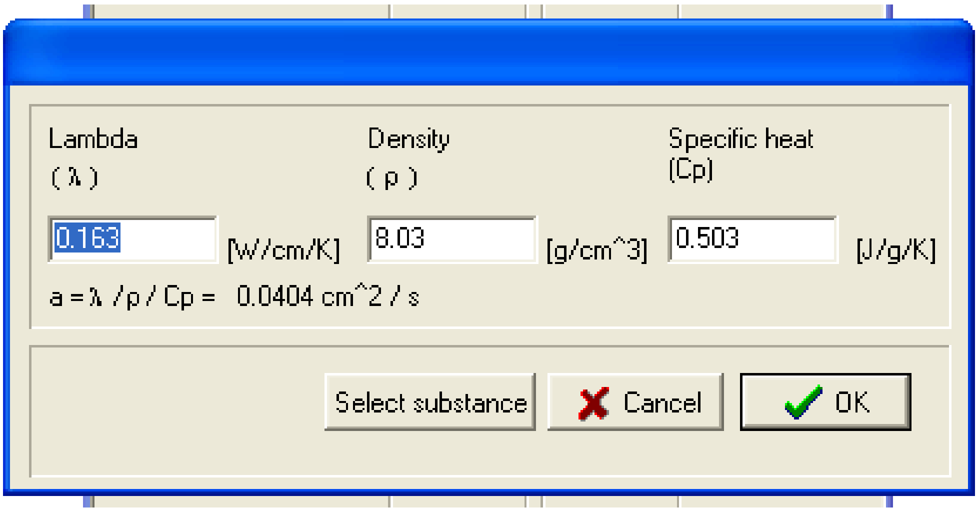


Fig-06

D1 の substance はスチールを選択し、Fig-06 のようなパラメータが設定されます。

同様に測定サンプルのパラメータは Fig-07 のように設定します。

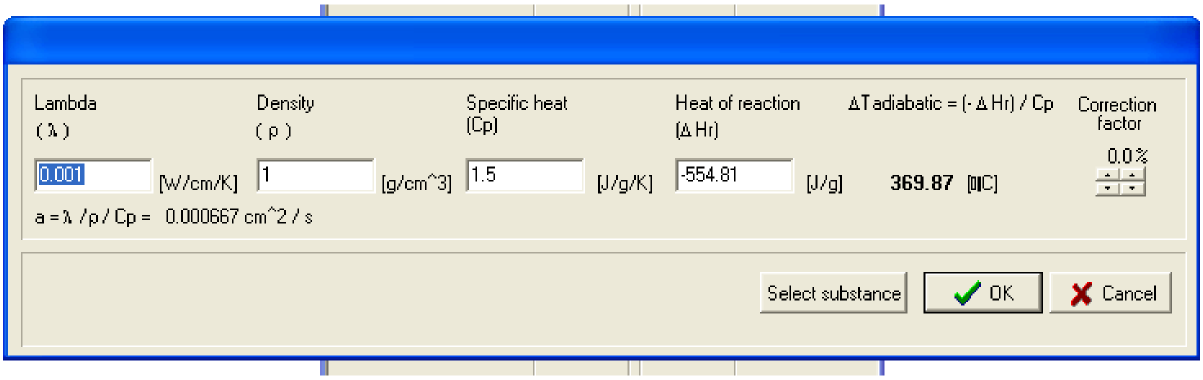


Fig-07

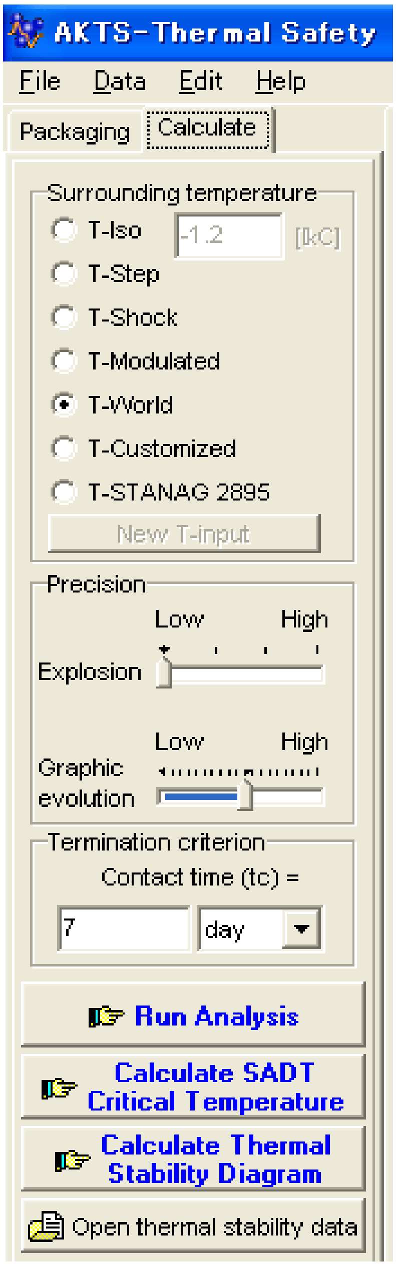
Heat　of　Reaction は DSC 測定データの発熱ピーク積分値から得られます。

密度ρ、比熱 Cp は別途　推定値あるいは実測値を入力します。

λは

ΔT adiabatic はλ、ρ，Cp が入力されると自動的に計算されます。

次に Caliculate（計算）をします。



次に Fig-8 の **Caliculate** の操作に移ります。

コンテナ外側の温度条件によって、化学物質が充填されたコンテナがどうのようになるかをシミュレーションする。

例は T-World　選択した都市の気候条件でコンテナに収納した化学物質がどのように振舞うか？をシミュレーションする。日本・東京の 8 月を選択してみる。

次の例として外部環境温度を 50°Cにした場合を設定する。
　Tiso を選択し、50℃を入力設定する。
　Run Analysis をクリックする。

最後に SADT を計算する。
温度範囲は 20~50℃の範囲で計算を実行する。

　コンテナ形状が Sphere の場合　SADT=40°C
　コンテナ形状が Infinitive　Cylinder の場合
　　　　　　　　　　　　　　　　SADT=37℃
となります。

Fig-08

ここで 2010-11-11 にトレーニングで使用した kpe ファイルを使って解析する例を示します。

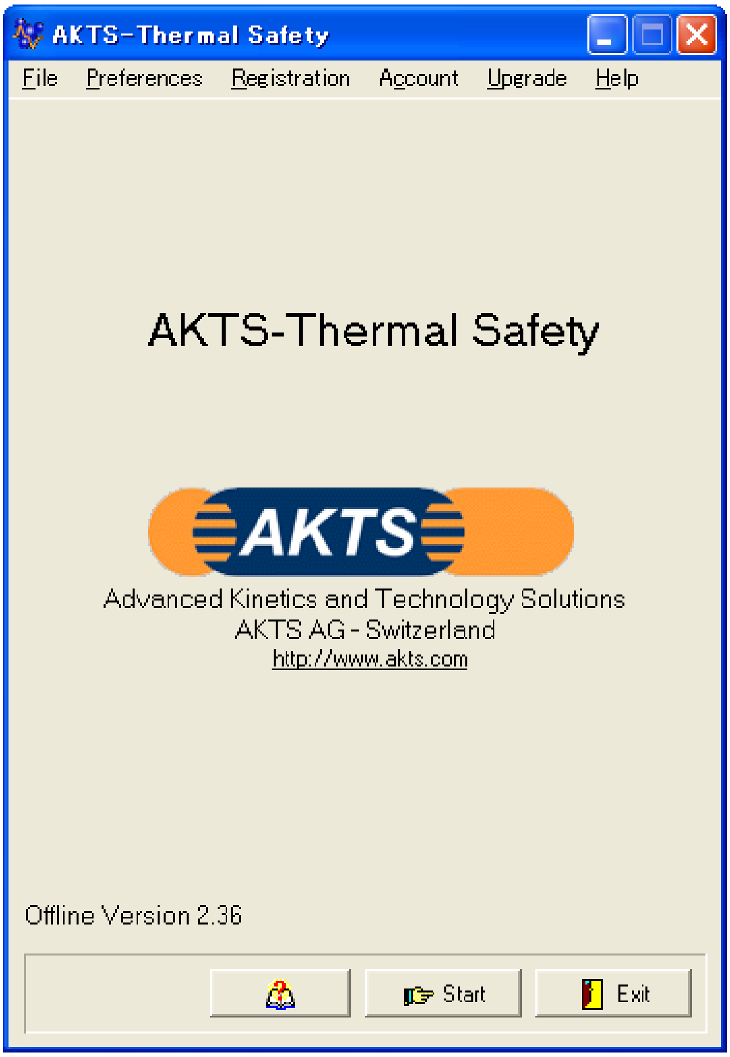


Fig-09

Start　をクリックします。

New Project を選択します。

解析終了後に解析結果を Save すると拡張子 aks のファイルが保存されます。

拡張子 aks は AKTS/Thermal Safety で解析されたファイルを意味します。

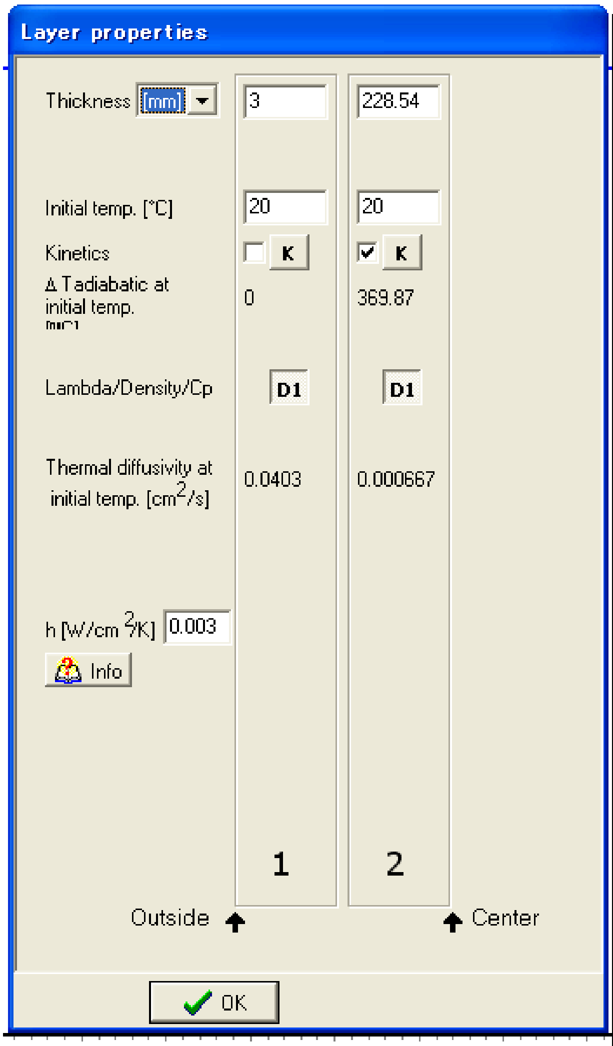


Fig-10

D1 は外側（Out-Side）
D２は中心部（Center）を意味します。
Outside 側 D1 欄にコンテナ条件を入力します。

3：コンテナ厚みが 3mm であることを示す
円筒コンテナ収納部外径は r ＝228.54mm
Kは Kinetics を意味します。
Outside 側D1 のK欄はブランクとします。
（スチールの活性化エネルギーは無意味）

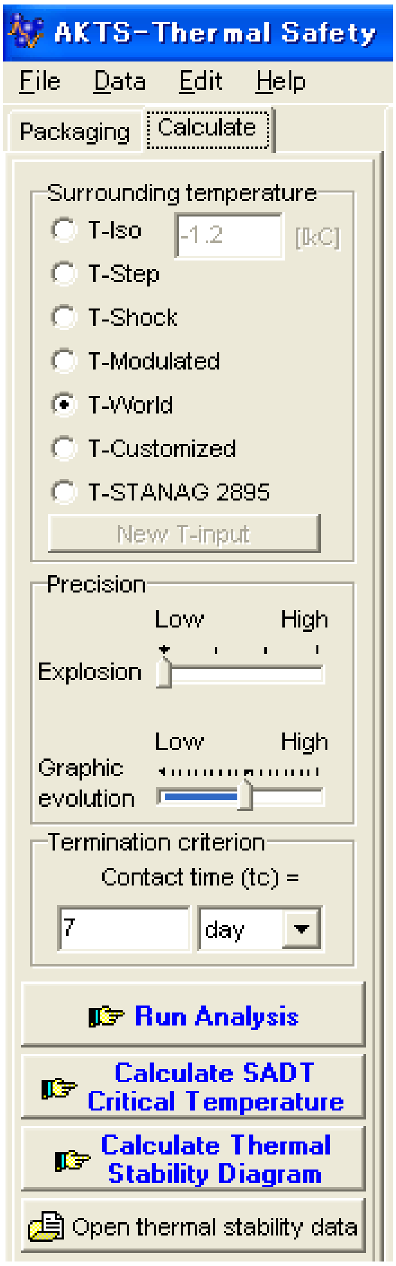
D2（収納する化学物質）側Kを Check します。

Tokyo-one-day Training Class の解析済 kpf ファイルである **DTBP OTgt OEA.kpe** を選択します。

Center 側のD1 をクリックすると
Lamda/Density/Cp で
熱伝導率、密度、比熱の値を設定する。
この場合 DTBP・Toulene　〇〇wt%に見合う数値を入力します。

D1 をクリックすると Fig-06 の入力画面が表示される。この３個の特性数値から
初期条件におけるａ：Thermal-diffusivity
熱拡散率（単位（cm^2/ｓ）が算出されます。

ｈ（熱伝導率　Thermal conductivity）
コンテナと外側空気層境界における熱伝導率は
0.003W/(cmK)とします。



次に Fig-12 の Caliculate の操作に移る。

例は T-World　選択した都市の気候条件でコンテナに収納した化学物質がどのように振舞うか？をシミュレーションする。

Fig-12

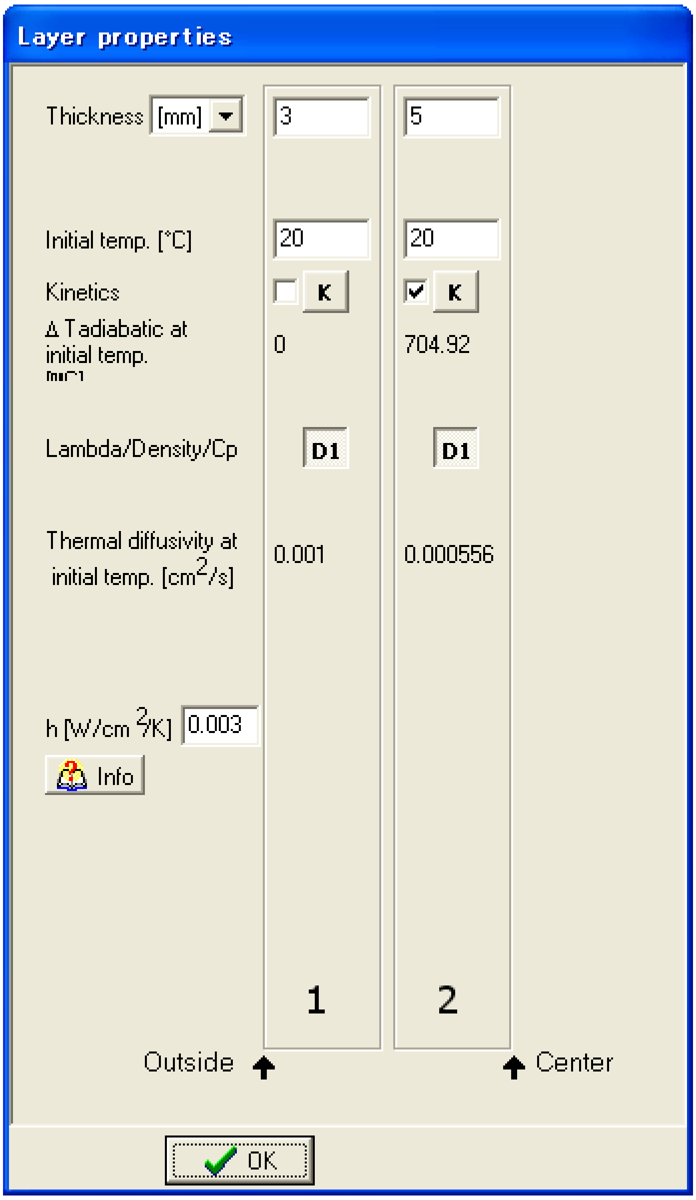


Fig-13

New　Project のデフォルトは Outside と Center の厚みが 3,5mmとなっているので
50L（50kg）の容器を想定するならそれに見合う Thickness を入力します。
とりあえず前回と同様に２（Center 側）に 228.54mm 入力します。

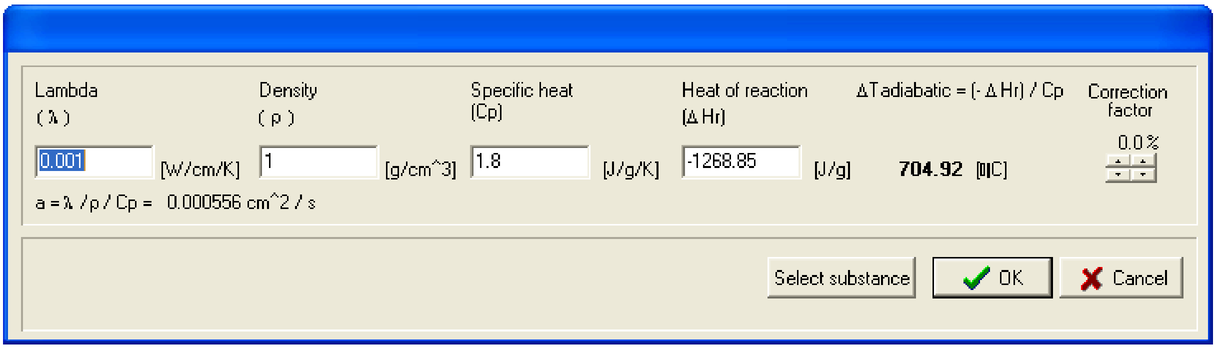


Fig-14

発熱量から判断して測定サンプルは　DTBP100%　のようです。

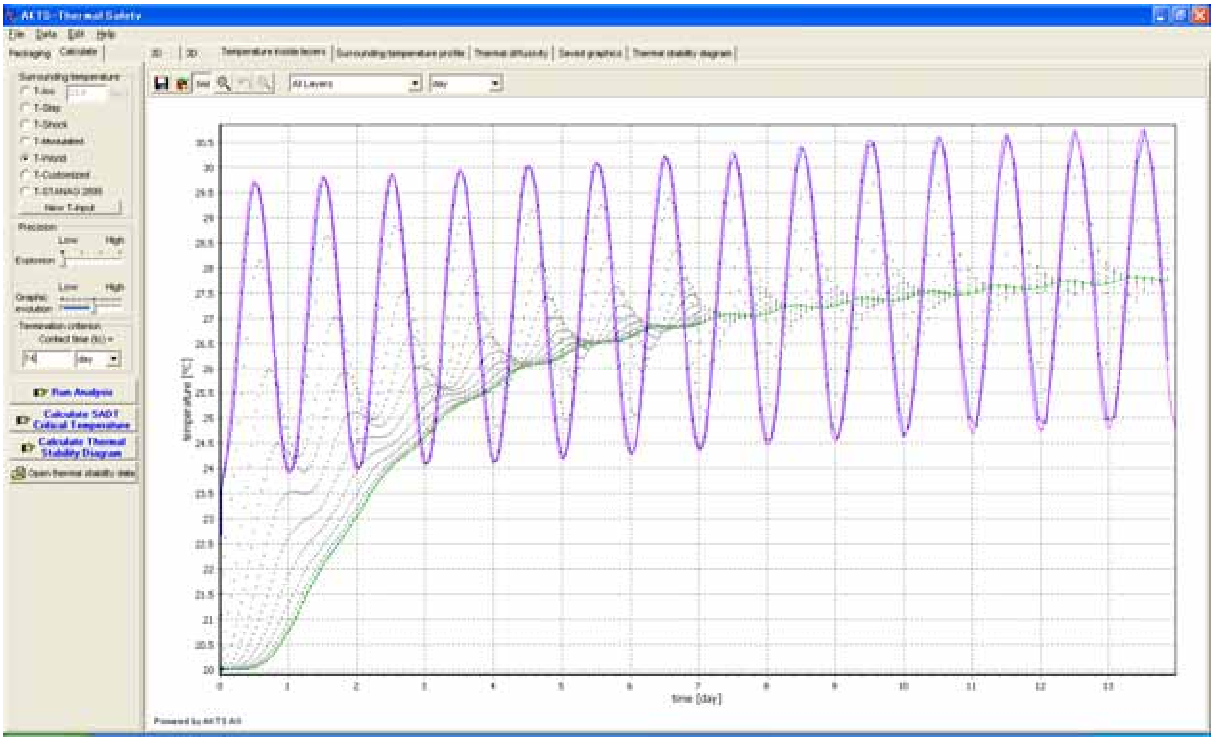


Fig-15

日本・東京の 8 月の気候条件でシミュレーションした結果です。

少なくとも危険な状態にはなりません。

それでは DTBP100%　50L を外気温度 50℃の状態に置いたらどうなるでしょうか？

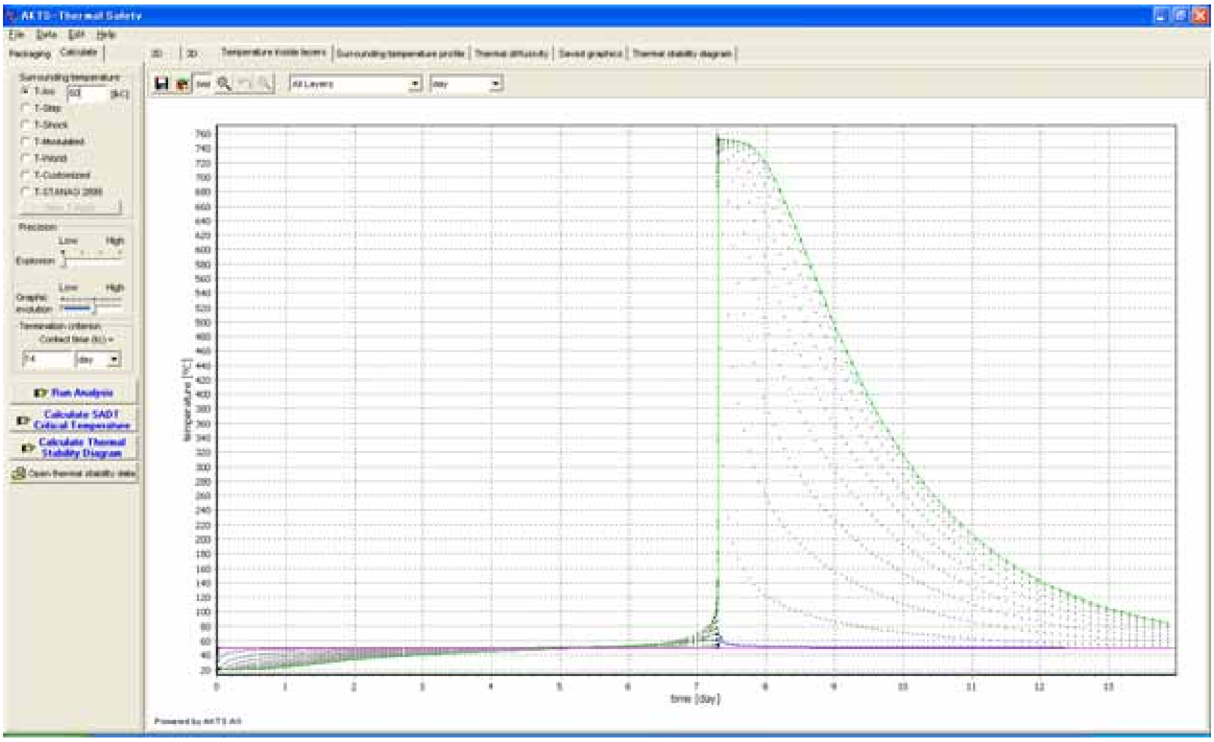


Fig-16

7.3 日後に暴走反応が起きて爆発的な発熱を起こしています。

この視シミュレーションを３D で見るには 3D をクリックし、次に Aminate をクリックします。

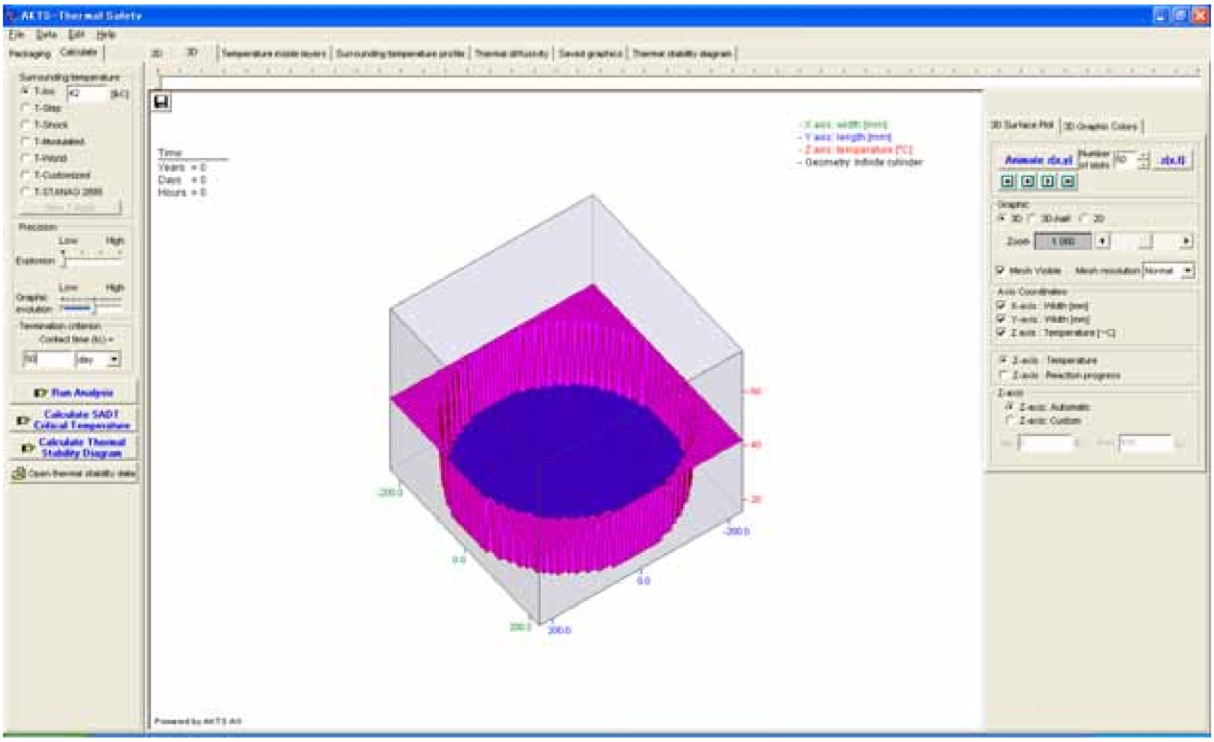


Fig-17

なお 3D でアニメーションする場合は２D で解析されていることが必須条件です。

Fig-17 はスタート時点の温度分布　周囲が 50℃、コンテナ容器と充填された化学物質の温度は 20℃です。

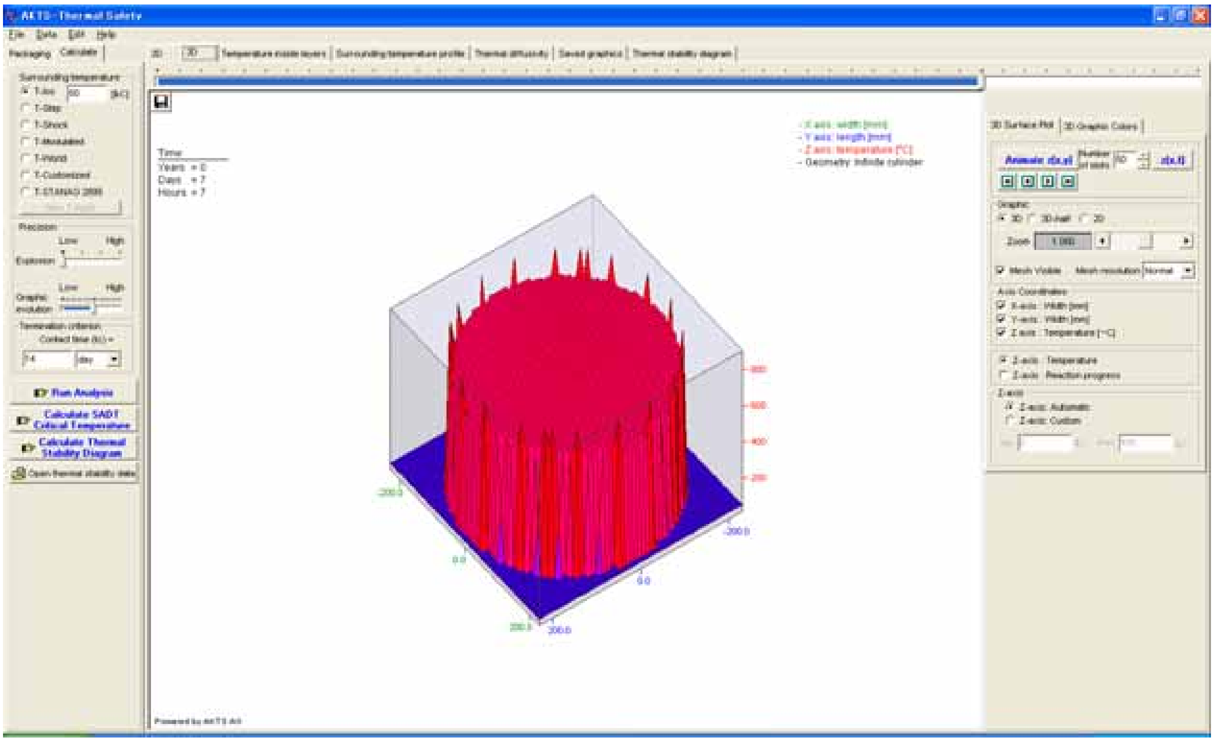


Fig-18

急激な暴走反応で 800℃程度まで温度上昇していることを示しています。

最後に SADT 温度を求めます。

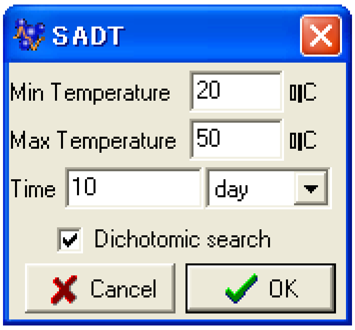


Fig-19

SADT 温度は 50℃以下にあると予想されます。

それでは SADT 温度は 20℃~50℃と推定し、20,50℃値を入力して探索・評価してみます。

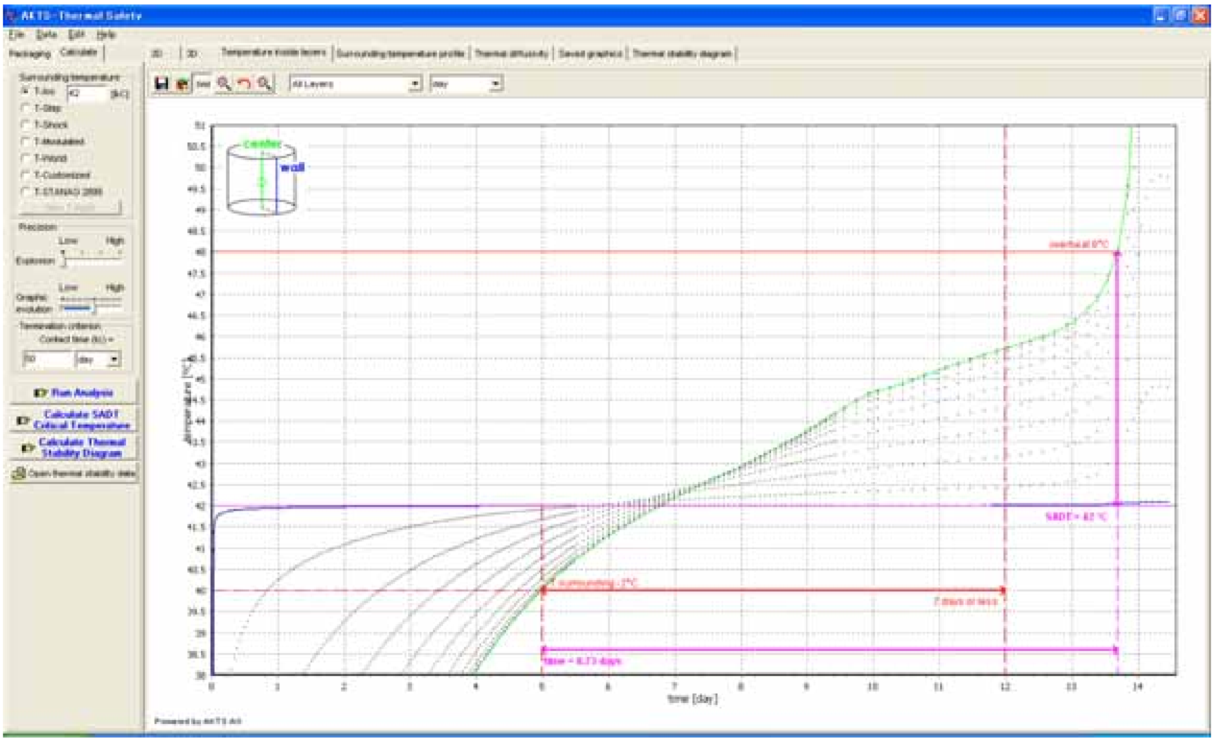


Fig-20

この解析結果の 42℃は無限円筒形の容器を想定した SADT 温度です。

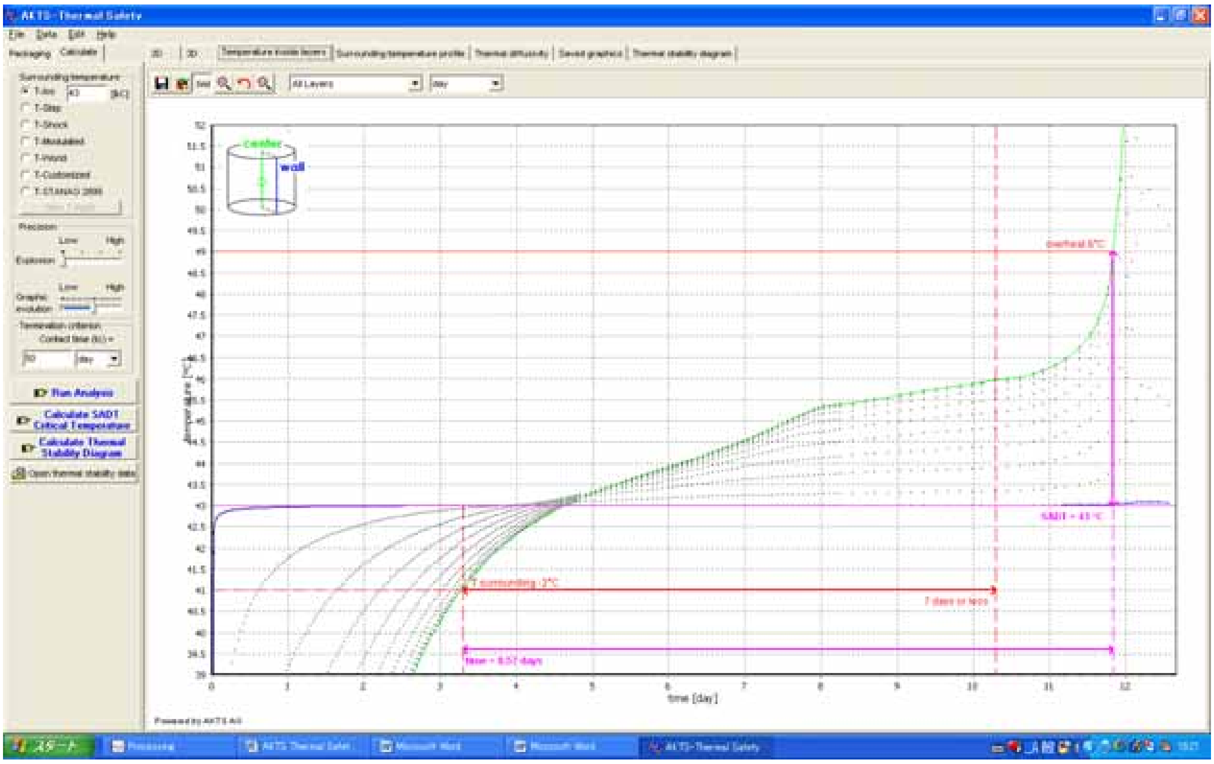


Fig-21

この解析結果の 43°Cは球形容器を想定した SADT 温度です。

円筒形と球形の表面積の違いが SADT　1°Cの違いとなっています。